

KUNSÁGI-MÁTÉ SÁNDOR



Pécsi Tudományegyetem
Gyógyszerésztudományi Kar
Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet

Cím: 7624 Pécs, Honvéd u. 1.

KUTATÁSI TERÜLET BEMUTATÁSA

Bioaktív molekulák transzportjában a gyenge molekuláris kölcsönhatások meghatározó szerepe abban rejlik, hogy egyrészt a transzport során egyes óriásmolekulákra történő adszorpció moderálja a végső hatást, másrészt befogadó molekulák alkalmazásával a bioaktív anyagok oldhatóságának – így transzportjának – szabályozása mellett azok szelektív érzékelése is megvalósítható. A kémiai egyensúlyokra vezető gyenge molekuláris kölcsönhatásokra a sztereokémiai és a szerkezetből adódó okok mellett a molekuláris környezet és a hőmérséklet is jelentős hatást gyakorol. Utóbbi években befogadó és bioaktív molekulák komplexeire vonatkozóan leírtuk a molekuláris környezet tömbfázisra jellemző paramétereinek hatását, vizsgáltuk a víz, mint meghatározó molekuláris környezet szerkezetét. Egyes esetekben target-specifikus terápiás alkalmazásokhoz kapcsolódóan antioxidáns, gyulladáscsökkentő mellékhatást vizsgáltunk. Célunk a befogadó molekulákkal megvalósított molekuláris csomagolásnak egyes gyógyszer hatóanyagok stabilitására, szabályozott, target-specifikus 'elengedésére', ebben a mikroszolvatáció szerepére vonatkozó vizsgálatok végzése, valamint kapcsolódó általános mechanizmusok felderítése.

ELSAJÁTÍTHATÓ TECHNIKÁK

Gyenge molekuláris kölcsönhatások vizsgálata (mérések és kiértékelések) fluoreszcenciás (steady-state, anizotrópia, fluoreszcencia élettartam, anizotrópia élettartam, oldószer-relaxáció) módszerekkel. Fehérjedinamika vizsgálata pásztázó és izoterm kalorimetriás módszerekkel. Rezgési spektroszkópia pásztázó Raman spektrométerrel, felület (Surface Enhanced Raman Spectroscopy, SERS) és csúcs-erősített (Tip Enhanced Raman Spectroscopy, TERS) Raman spektroszkópia. Elméleti kémiai modellezések személyi és szuperszámítógépeken Hyperchem és Gaussian programcsomagokkal.

VÁLOGATOTT KÖZLEMÉNYEK

Kovács, F., Yan, H., Li, H., **Kunsági-Máté, S.** (2021) Temperature-Induced Change of Water Structure in Aqueous Solutions of Some Kosmotropic and Chaotropic Salts. *Int J Mol Sci* **22**: 12896.

Preis, Zs., Hartvig, N., Bognár, B., Kálai, T., **Kunsági-Máté, S.** (2021) Comparative EPR Study on the Scavenging Effect of Methotrexate with the Isomers of Its Photoswitchable Derivative. *Pharmaceuticals* **14**: 665.

Preis, Zs., Nagymihály, Z., Lemli, B., Kollár, L., **Kunsági-Máté, S.** (2020) Weak interaction of the antimetabolite drug methotrexate with a cavitand derivative. *Int J Mol Sci* **21**: 4345.

Kovács, F., **Kunsági-Máté, S.** (2020) Change of liquid water structure under the presence of phosphate anion during changing its kosmotropic character to chaotropic along its deprotonation route. *Chem Phys Lett* **756**: 137827.

Bencze, F., Kiss, L., Li, H., Yan, H., Kollár, L., **Kunsági-Máté, S.** (2024) Effect of the Protic vs. Non-Protic Molecular Environment on the cis to trans Conformation Change of Phototrexate Drug. *Int J Mol Sci* **25(23)**: 12703.